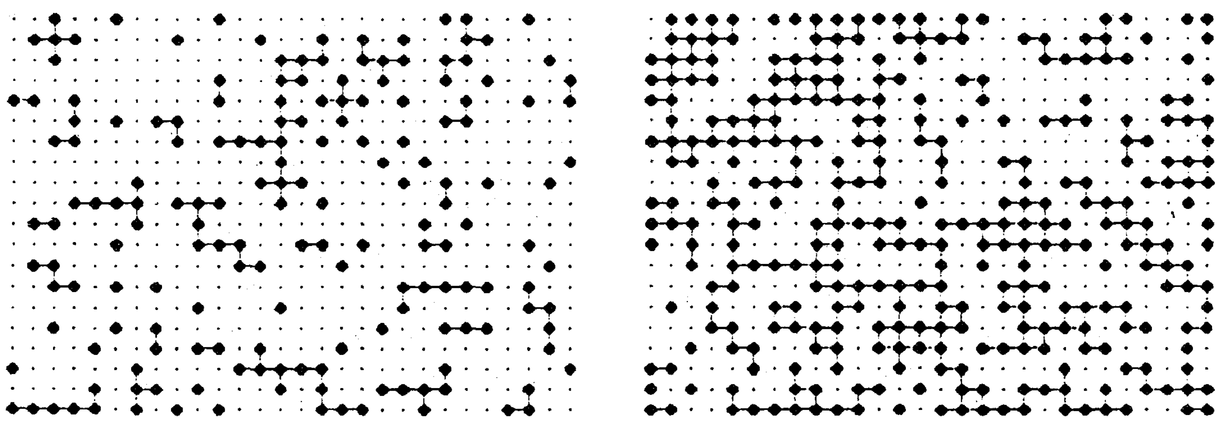
パーコレーション・パターンのトポロジー

京都大学教養部物理　　　冨田　博之

パーコレーション問題は文字どおり訳せば浸透の問題であるが，この研究会の趣旨に沿った言い方をするなら，ランダムな空間図形のつながり方の問題である．最も純化された例では，図のように無限に広がった格子の各格子点（サイト）に，独立な確率pで黒石●を置いたとき，「どれくらいのpの値で無限につながった図形ができるか？」を問う．ただし，図の例では，最近接点（上下または左右）に●が隣あったときにだけ「つながった」としてある．つながりが問題になるのであるから，隣接格子点間の結合子（ボンド）を独立にランダム配置する，というふうに問題設定した方が直接的である．この場合を「ボンド問題」，前者を「サイト問題」という．いずれの場合にも一連のつながったランダムなサンプル図形をクラスタと呼ぶ．



p=0.3　　　　p=0.6

図１　パーコレーションの図形　（２次元正方格子・最近接サイト問題）

このようにして定義されるパーコレーションの問題を整理すれば

（１）パーコレーション限界値p_cは？

p_cは「無限に離れた２点が同一のクラスタに属する確率が０でなくなるp」と定義され，相転移と同じように次元・格子の種類・問題のタイプによって固有の臨界値が決まることが知られている．もちろん１次元鎖では$p_c=1$である．

（２）p_c以降のクラスタの成長の仕方は？

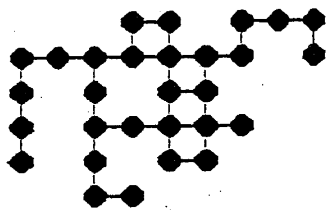
例えば，無限大のクラスタに属する格子点が全体に占める比が，$(p-p_c)^b$のようなべき法則に従うことなどの事実が知られている．

（３）$p=p_c$での臨界図形はフラクタルか？

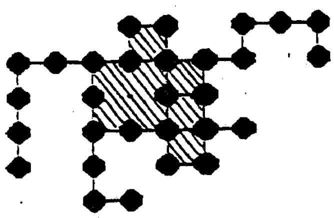
$p=p_c$ではクラスタはランダムな自己相似図形であり，つながり方からみた次元が非整数の，いわゆるフラクタル図形になることが知られている．

このように問題設定はきわめて単純であるにもかかわらず，理論的に解明されていることはまだ十分ではないが，コンピュータにとっては得たりの問題であって，少なくとも数値解析の点ではほぼ全容が解明されてしまったといってもよい段階である．例えばp_cの値については，２次元系では有効数字で６桁くらいまで信頼できるシミュレーションが報告されている。

ここではこのパーコレーション問題を「空間のつながり方のトポロジー」という観点から考察してみよう．しかしながらトポロジーは連続空間の概念であるから，上で述べたような格子問題（Z^d空間）にはなじみにくい，という事情がある．例えば図２のようなクラスタがあったとき，これを１次元の図形とみるか，２次元の図形とみる方が妥当かは確定できない．１次元の「線」からできた図形とみれば，考えている空間が何次元であろうとトポロジーを考察するのに何等あいまいさはないのであるが，パーコレーションの観点からはこれが適切ではないことは，格子点が全部●で埋まった状態（p＝１）を想定するとわかる．すなわち，この状態（p＝１）は空間のつながりという観点からは，無の状態（p＝０）と同じくらい単純なトポロジーを持つとするのが自然であるが，線図形とみなす限り最も複雑につながりあった図形とみなさざるを得ないのである．かと言って２次元図形とみなすにもあいまいさがあることは，図２で明かであろう．このようなあいまいさを避けようと思えば，点や線を置いていくかわりに，タイル（あるいはｄ次元ブロック：つながりを一義的にするには，２次元なら正６角形タイル，３次元ならケルビン１４面体ブロックにすればよい）を敷き詰める問題にすればよいのであるが，そこまで無理するくらいなら始めから連続空間（R^d）で問題を設定しなおす方が賢明であろう．



１次元図形？



２次元図形？

図２

連続空間でのパーコレーション問題とは，物理的には「金属とガラスをどろどろに溶かして混ぜ合わせてから固めた時，どれくらいの体積組成比で全体として導体になるだろうか？」あるいはポテンシアル的な見方をするなら，ランダムな地形に水を入れていった時，水面の高さの上昇に伴って発展していく湖ないし海のつながり方の問題，ということになるが，先に述べた格子問題と同じように純化すれば以下のようになる．

ｄ次元の（ユークリッド）空間の各点$\mathbf{r}$に独立な（スカラ的）確率変数$\{f(\mathbf{r})\}$，すなわち「確率場」を与え

$$f(\mathbf{r}) < U$$

となる部分を「海」と呼ぶ．しかし，各点の間が全く独立なら，これでは「海」（トポロジーを考察する対象となる連続な部分空間＝多様体）が定義されないので，局所的に均された，いわゆる粗視化した場を導入する．すなわち，注目している点の周りで適当な重みを持った平均操作

$$u(\mathbf{r}) = \int K(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\, f(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}'$$

を行えば，$u(\mathbf{r}) < U$ で「海」を定義できるようになる．この新しい確率変数 $\{u(\mathbf{r})\}$ は，元の場 $\{f(\mathbf{r})\}$ が全く独立なら，よく知られているようにガウス分布に従う（中心極限定理）．ただし，その平均および共分散（相関関数）は，元の場が

$$\langle f(\mathbf{r}) \rangle = 0$$
$$\langle f(\mathbf{r}_1)\, f(\mathbf{r}_2) \rangle = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$$

と規格化してあるならば

$$\langle u(\mathbf{r}) \rangle = 0$$
$$\langle u(\mathbf{r}_1)\, u(\mathbf{r}_2) \rangle = \int K(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}')\, K(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_2)\, d\mathbf{r}'$$

で与えられる．すなわち，連続体における最も純化したパーコレーション問題は，いささか我田引水的であるが，「相関のあるガウス確率地形における引水の問題」ということになる．

パーコレーションでは空間（「海」）のつながりだけに関心を持てばよく，３次元以上で現われる「からみ合い」は問題にする必要はない．また，対象となる多様体はユークリッド空間の中の「うらおもてのある閉曲面で囲まれた部分空間」であって，トポロジーとしては最も自然なものだけである．このように問題が限定されておれば，図形のトポロジーを特徴づけるには，実は「オイラー標数」（以下ＥＣと略す）で十分である．ＥＣはもともと多面体の特性量であって，今の場合のような滑らかな曲面で囲まれた図形の場合には，多面体に分割することにより定義され，中身の詰まった団子なら＋１，ドーナツなら０，２連のドーナツならー１，．．．逆に中空のピーマンは＋２，２連のピーマンなら＋３，．．．．となる．３次元の場合，水面の高さＵが十分低い時には孤立した「湖」群であり，水面が上昇するにつれ湖がつながり「網状」に発展する．さらに上昇すると「泡状」のつながり，すなわち，孤立した「３次元島」に対応する空洞群を持った構造になる．このトポロジー変化は

$$EC > 0 \ \rightarrow \ EC < 0 \ \rightarrow \ EC > 0$$

で表わすことができる．さらに４次元では，この次に「４次元島」の空洞のあいたもう一つの「泡」構造が現われる．正確には，つながりだけに注目して「海」を可能な限り痩せ細らせてできる極限の図形（リトラクトといい，ＥＣはこの操作で不変）の次元が，０（点）→１（線）→２（面）→．．．→ｄ－１と変化し，最後に完全に詰まった状態で完全なｄ次元空間となるわけである．

曲面で囲まれた空間では，ＥＣは表面上の曲率（Ｇａｕｓｓ－Ｂｏｎｎｅｔの定理），または内部に含まれる臨界点（$\nabla u = 0$）の分布で計算できること（Ｍｏｒｓｅの定理）を利用すれば，今の場合，要するに多変量正規分布による期待値の計算に帰着する．空間のスケールや場の振幅の単位をすべて省略して，単位体積あたりのＥＣ密度の形で結果を表わせば，ｄ次元空間では

$$\chi_d(U) = H_{d-1}(-U)\exp(-U^2/2)$$

となる．ただし，Ｕは水面の高さを表わす変数，$H_n(x)$ はエルミート多項式である．この結果の重要な点は，この関数形がガウス場の相関の形を具体的に含まないという意味で普遍性を持ち，先に行なった独立場の粗視化の仕方にはよらないことである．

$\chi_d(U)$ は，エルミート多項式の性質により，Ｕの値が$-\infty$から上昇するにつれ，ちょうど上で述べたとおりの符号の変化を示すが，この論法でいけば最初の０点

$$\chi_d(U_c) = 0$$

が「パーコレーション限界」ということになる．実際，Ｕの代わりに「海」の占める組成比

$$\phi = \int_{-\infty}^{U} \exp(-u^2/2)\,du/\sqrt{2\pi}$$

を用いるなら，限界値は

$$\begin{aligned} \phi_c &= 1 && (d=1) \\ &= 0.5 && (d=2) \\ &= 0.15856.. && (d=3) \end{aligned}$$

となり，d＝1は自明，d＝2は対称性から知られている値1／2，d＝3ではシミュレーションや格子問題から推量されている値（0．15〜0．16）に一致する．ランダムな図形に対するECという意味では，ϕ_cは局所的な小さい島や池によってその値がいくらでも変わり，単に「平均的なトポロジーの変化する点」という意味しか持たないが，実はχ_d（U）の関数形の普遍性により，このような微細構造を塗りつぶしても不動であることを示すことができる．要するにχ_d（U）＝0の点では，図形は特徴的な長さを持たない（統計的に）自己相似な図形になっているのである．

最後に，上で述べたパーコレーション図形のトポロジー変化は，考える空間（図形の埋め込まれる空間）の次元dを連続なパラメータに拡張することにより，さらに理解しやすくなる．これは数学的には解析接続により得られるが，結果を図に示すことにとどめよう．図にはχ_dの符号と，それが変化する零点の分枝をϕの関数として示してある．領域D_0では孤立した図形のみ，D_1では網目状にパーコレート，D_2では「泡状」．．．．となる．

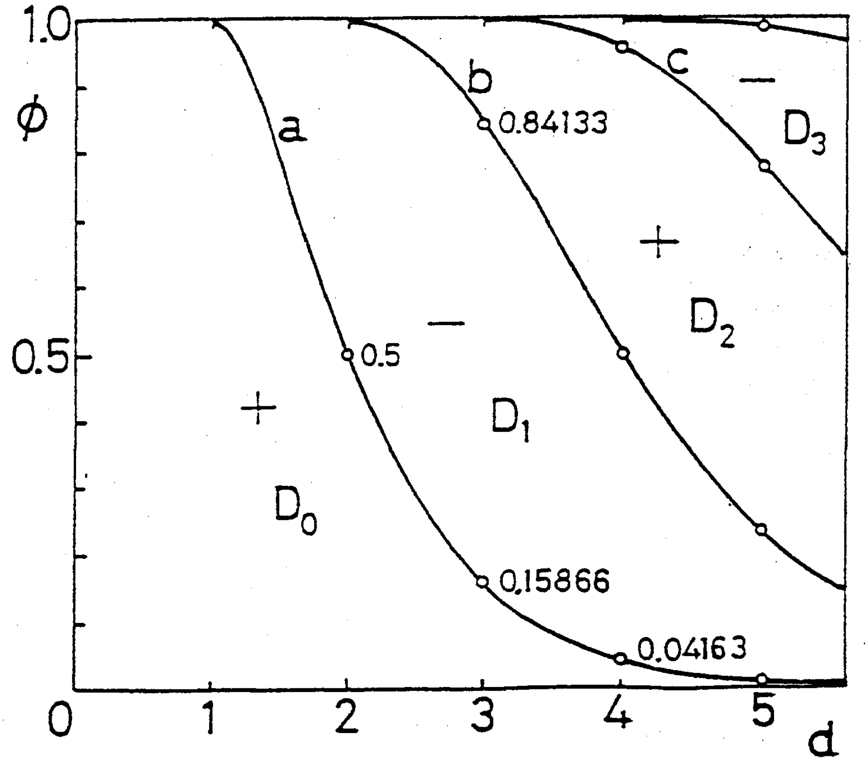


図3　連続次元への拡張とパーコレーション図形の相図

（参考文献）

1) H.Tomita, Progress of Theoretical Physics, vol.76,(1986),p.952.

2) H.Tomita and C.Murakami,'Statistics of Random Pattern' in 'Dynamics of Ordering Processes in Condensed Matter', ed. S.Komura,(Plenum Publishing Co. in press)

討論（DISCUSSION）

パーコレーション・パターンのトポロジー　　冨田　博之（京大・教養・物理）

Q．正方格子に点を打っていくモデルで、間に打たれた点の隣にくる確立を下げる、即ちポテンシャルを入れたモデルの方が液体の混合のような real な問題への応用面が広いのではないか。そうゆう計算や理論はあるのか。

細矢　治夫（お茶大・理・化学）

A．文字どおり「点を打つ」（シーケンシャル）という形で実行した文献は知らないが、結果的に隣接点間の相関を考慮したものは、まさに相転移の問題であって枚挙にいとまがない。パーコレーションに注目したとき、問題を無相関という極限にまで純化しても、まだハードな壁が立ちはだかっているということだ。

Q．（宮崎　興二氏に）２、３次元でも見られるある種のクラスターの形を冨田氏は「泡」と表現したが３＋α次元から始まるクラスターの形を４次元人は何と表現するのでしょうか？　小川　泰（筑波大・物理工）

A．

C．系の大きさを無限大にした極限では、規則的配置の重率は無限小となり、相転移を数学的特異点と見る物理学的（統計力学的）理解のように、パーコレーションは厳密に定義できると思います。一方、全くの無相関ランダムというパーコーレーション模型は、現実との比較という観点からは簡単すぎるでしょうか。議論はこれから始めざるを得ないと思います。

小川　泰（筑波大・物理工）

C．合金では網目状につながることが重要だろうが、たとえば発泡コンクリートでは空泡が泡状になっていないとこまる。

清水　達雄（清水建設（株）技術研究所）